



TITLE:

17.LaCo金属間化合物の電子構造と磁性(名古屋大学大学院工学研究科応用物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1988年度))

AUTHOR(S):

宮口, 孝司

CITATION:

宮口, 孝司. 17.LaCo金属間化合物の電子構造と磁性(名古屋大学大学院工学研究科応用物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1988年度)). 物性研究 1989, 53(1): 95-96

ISSUE DATE:

1989-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93838>

RIGHT:

形動力学の側面に光を当てるため、流体を理想化して、非圧縮非粘性を仮定し、速度場の時間発展をモード展開法で計算するための新しい高精度の数値スキームを開発した。一般に、非線形相互作用のために、低波数のモードに注入したエネルギーは高波数のモードに移っていくことが期待される。この機構はエネルギー・カスケードと呼ばれる。計算の結果、それほど多くはない自由度の系でも、エネルギー・カスケードが起こっていることが確かめられた。ヘリシティ ($\int \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega} \, d\mathbf{v}$, \mathbf{v} : 速度, $\boldsymbol{\omega}$: 渦度) と呼ばれる保存量で、モード間の非線形相互作用の強さを表す一つの尺度である。ヘリシティの絶対値の大きい流れは、小さい流れに比べて、非線形性が弱まり、その結果エネルギー・カスケードが抑えられると予想されている。エンストロフィー ($\int \boldsymbol{\omega}^2 \, d\mathbf{v}$) の時間変化のヘリシティの大きさに対する依存性を調べた結果は、この予想が正しいことを示唆している。また、計の保存量由エネルギー及びヘリシティー野保存が非常によいことが確かめられた。

17. LaCo金属間化合物の電子構造と磁性

宮口孝司

La_2Co_3 と $\text{La}_2\text{Co}_{1.7}$ は Co モーメントが約 $0.3 \sim 0.9 \, \mu_B / \text{atom}$ の反強磁性である。これは同じ組成範囲にある Y-Co 化合物が常磁性であるのと対照的である。また、 $\text{La}_2\text{Co}_{1.7}$ の結晶構造には Co 原子が1次元的に配列している部分があり、これらの Co-chain は互いに相関を持たず不規則に配列している。本研究の目的は、これらの金属間化合物の電子構造を実空間に於て計算することにより、Co モーメント出現の理由を明らかにすることである。さらに、 $\text{La}_2\text{Co}_{1.7}$ の Co-chain の1次元性、及びそれらの不規則な配列が電子構造に与える影響を調べる。状態密度の計算の結果、Fermi-level 近傍に Co のピークが存在することがわかった。これが、Co がモーメントを持つ理由と考えられる。モーメントの大きさも定性的に実験値と一致する。

$\text{La}_2\text{Co}_{1.7}$ の状態密度のピークは、Co-chain の存在のためと考えられる。不規則性の影響は定量的には大きくない。反強磁性の出現する理由も議論する。

18. モット・ハバード型絶縁体に導入された正孔に関する 理論的研究

宮崎基弘

酸化物高温超伝導体には、 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ などがある。これらの物質には、Cu が O をはさんで 2 次元正方格子を作った CuO_2 面が共通に存在し電流はその面方向に流れやすい。また、これらの物質は同位体効果をほとんど示さないなどのことから、従来の超伝導の基礎理論である BCS 理論の枠組みからはずれている可能性が指摘されている。

またこれらの物質で $x=0$, $\delta=0$ では反強磁性絶縁体であり、モット・ハバード型絶縁体と考えられる。このような現象について、2 次元 CuO_2 面で、正孔が導入される前は量子ゆらぎの大きい反強磁性状態が基底状態であり、正孔が導入されると、RVB (共鳴価電子結合) 状態が安定になり超伝導が出現する、という理論的予測がある。しかし、電子のスピン間の交換相互作用を無視した範囲内での正孔の運動エネルギーの計算からは、RVB 状態が安定になることはない結論されていた。

本研究の目的は、このように正孔が導入されて超伝導が出現する付近の領域で、RVB 状態の安定性を調べることである。そのためまず絶縁体の状態で RVB 状態のエネルギーを求めた。すると、RVB 状態のエネルギーは基底状態に比較的近くなった。次に正孔の運動エネルギーをスピン間の交換相互作用を考慮して計算した。すると RVB 状態が安定になる領域があり、スピン間の交換相互作用が重要であることがわかった。これらの結果より、モット・ハバード型絶縁体に正孔を導入すると RVB 状態が安定になることが明らかになった。